

<p style="text-align: center;">2. Übungssektion: – Computerorientierte Theoretische Physik 1D Schrödinger Gleichung</p>

Erster Übungstermin dieser Sektion: 01.11.2018, Die Nachbereitungsaufgaben sind in der folgenden Übung nach Abschluss dieser Sektion abzugeben/zu besprechen.

Vorbereitungsaufgabe 1 : *Petsc und Slepc*

1. Petsc und Slepc sind zwei aufeinander aufbauende linear Algebra Pakete für dünnbesetzte Matrizen. Insbesondere beinhalten diese Solver für das Lösen von linearen Gleichungssystemen, Eigenwertproblemen etc.. Wir werden diese viel in der Übung verwenden. Die Pakete sind im PC Pool schon vorinstalliert.
2. Daher lesen etwas in den Bedienungsanleitungen der beiden Pakete (erstmal im Web finden) und informieren Sie sich über das Petsc eigene Objektmodell, wie einfache Vektoroperationen ausgeführt werden und auch wie Eigenprobleme in Slepc gelöst werden.
3. Bonus: Wer möchte kann, sich auch über die Objekte, die direkt Gitter behandeln, informieren.

Vorbereitungsaufgabe 2 : *Schrödingergleichung in 1D*

1. Wir wollen die Eigenwerte der stationären Schrödingergleichung lösen. Dazu müssen wir uns erstmal Gedanken über die Diskretisierung der Schrödingergleichung in 1D machen. Also schreiben Sie mit Bleistift und Papier eine diskretisierte Form der Schrödingergleichung auf.
2. Numerik testet man am besten anhand von bekannten analytischen Lösungen, suchen Sie nach einfachen Beispielen für Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung in verschiedenen Potentialen in einschlägigen Lehrbüchern, die Sie gerne testen wollen. (z.B. Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, periodische Deltapotentiale).
3. Überlegen Sie welche Potentiale/physikalischen Situationen Verallgemeinerungen darstellen, die Sie gerne testen wollen!

Aufgabe 3 : *Schrödingergleichung in 1D*

1. Schreiben Sie ein Programm, dass die Eigenwerte der Schrödingergleichung löst. Slepc ist die beste Adresse dafür, am besten verwenden Sie das EPS Beispiel ex1 als Ausgangspunkt und versuchen Sie durch nachschlagen jede Zeile zu verstehen. Bemerkung: Der PC-Pool verwendet Petsc/Slepc Version 3.7. Sie sollten das Beispiel aus der gleichen Version nehmen.
2. Berechnen Sie nun die analytischen Beispiele, die Sie sich vorher ausgedacht haben und vergleichen Sie! Auch sollten Sie die Diskretisierung variieren. (Sie sollten mindestens 2-3 verschiedene physikalische Beispiele zum Testen untersuchen) Außer den Eigenwerten sollten Sie natürlich immer auch die Eigenfunktionen plotten und zu versuchen zu verstehen. Bonus: Wer Lust hat, kann eine Diskretisierung höherer Ordnung einbauen.

3. Testen Sie auch verschiedene Randbedingungen.
4. Nun untersuchen Sie Verallgemeinerungen der Beispiele, die nur numerisch gelöst werden können (z.B. endlicher Potentialkasten, anharmonisches Potential.)
5. Führen Sie immer Konvergenzanalysen durch.
6. Bonus: Das kann natürlich auch jenseits 1D durchgeführt werden, ist aber sehr, sehr viel aufwendiger. (Nicht unbedingt schwieriger.)